

2026年5月21日

株式会社ゼウレカ

UBE株式会社

ゼウレカとUBE、共同研究におけるリード認定マイルストーンを達成

株式会社ゼウレカ（東京都港区、社長：永江 大成、以下「ゼウレカ」）とUBE株式会社（東京都港区、社長：西田 祐樹、以下「UBE」）は、2025年12月に開始したがん領域における低分子創薬に関する共同研究（以下「本共同研究」）において、本共同研究契約に定めるリード認定マイルストーンを達成したことをお知らせします。

本共同研究では、UBEが特定したがん治療に有望な標的分子に対し、ゼウレカが開発した Free Energy Perturbation^{*1} プログラム「Xeureka FEP」や分子生成ツール「XE-Generator^{*2}」をはじめとする高度な計算創薬技術およびAI技術を駆使して新規低分子化合物のデザインを行っています。

今般、両社でデザインした化合物群の中から、あらかじめ両社で合意したリード認定基準を満たす化合物が複数見出され、共同研究の開始から約5カ月という短期間でリード認定マイルストーンの達成に至りました。

本達成は、ゼウレカの計算創薬技術が実際の創薬プロジェクトにおいて有効に機能することを示す成果であり、AIと計算科学を融合した創薬アプローチの有用性を裏付けるものと考えています。

本マイルストーンの達成に伴い、ゼウレカは本共同研究契約に基づく所定のマイルストーンフィーをUBEより受領します。

UBEでは、これまでデザインした化合物の有効性を検証するために実際に化合物を合成してスクリーニングを行ってきましたが、計算創薬技術の活用によって、化合物の有効性をあらかじめ予測することが可能となり、少ない合成化合物数で効率的にリード化合物を見出すことができました。本成果は、創薬研究の大幅な効率化に資するものであり、UBEの創薬プロセスに大きな革新をもたらすことが期待されます。UBEは今後も計算技術の活用に積極的に取り組み、さらなるイノベーションの創出を目指します。

両社は今後も本共同研究を継続し、リード化合物の最適化を進めることで、新たな医薬品候補化合物の創出を目指していきます。

^{*1} Free Energy Perturbation：自由エネルギー摂動。リガンド（生体分子と特異的に結合する分子）とタンパク質の結合に伴う自由エネルギー変化を計算するための統計力学に基づいた手法で、高精度に活性を予測する手段の一つ。

^{*2} XE-Generator：ゼウレカが独自開発した分子生成ツール。Matched Molecular Pair（MMP）ベースの構造変換、バイオアイソステア置換、反応ベースの分子生成といった一般的な手法に加え、熟練のメディシナルケミストが創薬現場で培った経験と知識を基に一つ一つ手作業で構築した6,000以上の構造変換ルールを中核として備える。これにより、入力構造を起点として数千～数十万規模の実用性の高い化合物構造を網羅的に生成することが可能。

■株式会社ゼウレカについて

保有する大規模スーパーコンピューターと独自の計算創薬技術を基盤に、AI や大規模分子動力学シミュレーションなど多様な計算手法を駆使した創薬支援サービスを提供しています。これからも、高精度な活性予測から数十億規模のライブラリを対象としたバーチャルスクリーニングまで幅広いニーズに対応し、創薬研究の大幅な効率化と成功率の改善に貢献していきます。

【株式会社ゼウレカ 概要】

所在地	東京都港区虎ノ門3丁目2番2号
代表者	永江 大成
設立	2021年11月
株主	三井物産株式会社(100%)
事業内容	製薬企業様、バイオテック企業様向けにAI創薬支援サービスや計算環境(スーパーコンピューター)の提供、創薬を目的とした共同研究開発の推進
コーポレートサイト	https://xeureka.co.jp/

■UBE株式会社について

スペシャリティ化学を志向するUBEにおいて、医薬事業はライフサイエンス分野の中核事業となるべく、創薬研究事業では従来の低分子医薬品の他、ADC(抗体薬物複合体)などの高付加価値創薬に挑戦しております。また、CDMO事業では既存の低分子医薬品分野を拡充すると共に、新規モダリティの製造技術を駆使した核酸医薬品等を通じて、人々の生命・健康を守る手段を提供してまいります。

【UBE株式会社 概要】

所在地	東京都港区芝浦1-2-1 シーバンスN館
代表者	西田 祐樹
設立	1942年3月
事業内容	化学品の製造・販売、機械の製造・販売
コーポレートサイト	https://www.ube.com

以上

<報道関係者のお問い合わせ先>

株式会社ゼウレカ 管理部

E-mail : pr@xeureka.co.jp

UBE株式会社 コーポレートコミュニケーション部 広報グループ

TEL: 03-5419-6110 E-mail : contact_pr@ube.com